Lanczosova i Arnoldijeva metoda

Jandrić, Dolores

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU

PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET

MATEMATIČKI ODSJEK

Dolores Jandrić

LANCZOSOVA I ARNOLDIJEVA METODA

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Nela Bosner

Zagreb, Ožujak, 2022.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana ____________________ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. ____________________________, predsjednik
2. ____________________________, član
3. ____________________________, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom ________________.

Potpisi članova povjerenstva:

1. ____________________________
2. ____________________________
3. ____________________________

Majstori

Sadržaj

Uvod

U ovom radu opisana je najprije Lanczosova metoda, koja predstavlja tehniku za računanje nekoliko najvećih ili najmanjih (ekstremnih) svojstvenih vrijednosti za velike, rijetko popunjene simetrične matrice. Metoda se temelji na djelomičnoj tridijagonalizaciji matrice niže dimenzije. Analiza konvergencije pokazuje da se dobra aproksimacija ekstremnih svojstvenih vrijednosti može dobiti puno prije nego što se tridijagonalizacija dovrši u punoj dimenziji. Dali smo izvod metode i osnovna svojstva u egzaktnoj aritmetici, koja uključuje i opis konvergencije metode. U aritmetici konačne preciznosti, Lanczosova metoda može se pokazati nepraktičnom zbog gubitka ortogonalnosti Lanczosovih vektora nastalih kao produkt metode. Zbog toga smo opisali tehniku reortogonalizacije, koje popravljaju gubitak točnosti. Lanczosovu metodu možemo primijeniti i kod rješavanja nekih drugih problema kao što su singularna dekompozicija, sustav linearnih jednadžbi i problem najmanjih kvadrata. Na kraju smo opisali i Arnoldijevu metodu primjenjivu za općenite matrice, a koja se temelji na Hessenbergovoj dekompoziciji. Zbog velike potrebe za memorijom Arnoldijeve metode, opisali smo i varijantu metode sa restartom,te varijantu Lanczosove metode za tridijagonalizaciju nesimetričnih matrica.

Poglavlje 1

Svojstva i dekompozicija matrice

1.1 Definicije i osnovne činjenice

Neka je $\mathbb{R}$ prostor realnih brojeva. Vektorski prostor svih realnih matrica označavamo sa $\mathbb{R}^{m\times n}$, odnosno

$$A \in \mathbb{R}^{m\times n} \iff A = (a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} \dots a_{1n} \\ \vdots \quad \vdots \\ a_{m1} \dots a_{mn} \end{pmatrix}, \quad a_{ij} \in \mathbb{R}.$$

Također, u ovom radu, notaciju za stupac ili red matrice A označavam ćemo na sljedeći način:
Ako je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, tada $A(k,:)$ označava k-ti red matrice A, odnosno

$$A(k,:) = [a_{k1}, \dots, a_{kn}].$$

Dok, k-ti stupac označavamo sa

$$A(:,k) = \begin{pmatrix} a_{1k} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{pmatrix}.$$

Definirajmo sliku i jezgru matrice $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$.
Sliku matrice A definirajmo kao skup

$$R(A) = \{y \in \mathbb{R}^m; y = Ax, \quad za\ nekix \in \mathbb{R}^n\}$$

Ako je $A = [a_1, ..., a_n]$, gdje je $a_k = A(:,k)$, tada je $R(A) = span\{a_1, ..., a_n\}$.
Dok, je jezgra matrice $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$

$$N(A) = \{x \in \mathbb{R}^n; Ax = 0\}$$

Tada je rang matrice A

$$r(A) = \dim R(A)$$

i defekt matrice A je

$$d(A) = \dim N(A).$$

Također, vrijedi $d(A) + r(A) = n$. Navedeni rezultat je teorem o rangu i defektu[4].

Matricu $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nazivamo simetrična matrica ako je jednaka svojoj transponiranoj matrici,

$$A = A^T \quad \text{ili} \quad a_{ij} = a_{ji}, \quad \text{za} \quad i, j = 1, ...n.$$

Matrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je ortogonalna ako vrijedi $A^T A = AA^T = I_n$.

Teorem 1.1.1. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, za $m \geq n$ i neka je $r(A) = n$. Tada postoji jedinstvena (skraćena) QR faktorizacija oblika*

$$A = QR,$$

gdje je $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ortogonalna matrica, a R gornjetrokutasta matrica sa pozitivnim elementima na dijagonali.

Dokaz. Dokaz teorema u [2] Teorem 5.2.2. str. 230. □

Ortogonalna matrica je važna u računanju svojstvenih vrijednosti. Definirajmo Householederovu matricu koja će nam kasnije biti važna.

Neka je $v \in \mathbb{R}^n$, $v \neq 0$. Matrica P reda $n \times n$ oblika

$$P = I - \frac{2}{v^T v} v v^T$$

zove se Householderova matrica, a vektor v zove se Householderov vektor. Householderova matrica je simetrična i ortogonalna.
Sljedeće svojstvo simetrične matrice koje ćemo navesti je takozvana kvadratna forma. No, definirajmo najprije skalarni produkt i $2-$*normu* vektora i matrice na vektorskom prostoru $\mathbb{R}^n$.

Neka su $x, y \in \mathbb{R}^n$ proizvoljni. Skalarni produkt vektora x i y je broj

$$\langle x\,, y\rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$$

Također, $\langle x\,,y\rangle = y^T x = x^T y$.
Tada $2-$ *norma* vektora $x \in \mathbb{R}^n$ je

$$\|x\|_2 = \sqrt{\langle x\,,y\rangle} = \sqrt{x^T x} = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Matrična 2-norma definirana je

$$\|A\|_2 := \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}.$$

Definicija 1.1.2. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična matrica. Kvadratna forma pridružena matrici A je preslikavanje $Q : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ takvo da je*

$$Q(x) = x^T Ax, \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

Napomena 1.1.3. *Kvadratna forma je polinom drugog reda s n varijabli; Za $x \in \mathbb{R}^n$,*

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \tag{1.1}$$

$Q(x)$ možemo zapisati kao

$$Q(x) = (x_1, x_2, \cdots, x_n)A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j. \tag{1.2}$$

Također, za svaku simetričnu matricu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i vektor $x \in \mathbb{R}^n$ vrijedi

$$\nabla(x^T Ax) = 2Ax$$

i

$$\nabla(x^T x) = \nabla(\|x\|_2^2) = 2x.$$

Definicija 1.1.4. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Svojstvene vrijednost matrice A su nultočke (korijeni) karakterističnog polinoma $p(\lambda) = det(\lambda I - A)$.. Skup svih svojstvenih vrijednosti nazivamo spektar i označavat ćemo ga sa $\lambda(A)$. Nadalje, ako je $\lambda \in \lambda(A)$, tada nenul vektor $x \in \mathbb{R}^n$ ($x \in \mathbb{R}^n$ za simetrične matrice, a općenito je $x \in \mathbb{C}^n$), koji zadovoljava $Ax = \lambda x$, nazivamo svojstveni vektor matrice A pridružen svojstvenoj vrijednosti λ.*

Neka je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, spektralni radijus $\rho(A)$ je

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ svojstvena vrijednost od } A\}$$

Tada matričnu 2-normu možemo odrediti na sljedeći način

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$$

Definicija 1.1.5. *Rayleighjev kvocijent, za simetričnu matricu $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ i vektor $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$, definiran je sa*

$$r(x) = \frac{x^T A x}{x^T x}.$$

Ključno svojstvo Rayleighovog kvocijenta je ako je x svojstveni vektor simetrične matrice A, tada $r(x)$ daje odgovarajuću svojstvenu vrijednost.

Napomena 1.1.6. *Rayleighov kvocijent se može proširiti i na općenitiji oblik matrice (hermitsku matricu), no fokus ovdje je simetrična realna matrica.*

1.2 Svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori

Najvažnije svojstvo simetričnih matrica je da imaju realne svojstvene vrijednosti i da se mogu dijagonalizirati ortogonalnim matricama. Odnosno, ako je A simetrična matrica reda n, tada ima n realnih svojstvenih vrijednosti $\lambda_1, ..., \lambda_n$ (ne nužno različitih) i postoji ortonormirana baza svojstvenih vektora. Navedimo par teorema koje će nam koristiti kasnije.

Teorem 1.2.1 (Simetrična Schurova dekompozicija)**.** *Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična, onda postoji realna ortogonalna matrica Q tako da vrijedi*

$$Q^T A Q = \Lambda = diag(\lambda_1, ..., \lambda_n).$$

Štoviše, za $k = 1, ..., n$, $AQ(:, k) = \lambda_k Q(:, k)$.

Dokaz. Dokaz možete pogledati u [1] □

Teorem 1.2.2. *Pretpostavimo da je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična i da $Q_1 \in \mathbb{R}^{n \times r}$ zadovoljava $Q_1^T Q_1 = I_r$. Ako*

$$Z^T (Q_1^T A Q_1) Z = diag(\theta_1, \ldots, \theta_r) = D$$

je Schurova dekompozicija od $Q_1^T A Q_1$ i $Q_1 Z = [y_1, \ldots, y_r]$, tada

$$\|Ay_k - \theta_k y_k\|_2 = \|(I - Q_1 Q_1^T) A Q_1 Z e_k\|_2 \leq \|(I - Q_1 Q_1^T) A Q_1\|_2$$

za $k = 1, \ldots r$.

Dokaz. Dokaz u [2]. □

U gornjem teoremu, θ_k vrijednosti se zovu *Ritzove vrijednosti,* y_k su *Ritzovi vektori,* a (θ_k, y_k) se zove *Ritzov par.*

Teorem 1.2.3. *Pretpostavimo da je* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *simetrična i da*

$$AX_1 - X_1 S = F_1,$$

gdje je $X_1 \in \mathbb{R}^{n\times r}$ *i* $S = X_1^T A X_1$. *Ako*

$$||X_1^T X_1 - I_r||_2 = \tau < 1,$$

onda postoji $\mu_1, \ldots, \mu_r \in \lambda(A)$ *takve da*

$$|\mu_k - \lambda_k(S)| \leq \sqrt{2}(||F_1||_2 + \tau(2+\tau)||A||_2)$$

Dokaz. Dokaz u [2] Teorem 8.1.16. str. 402. □

Za simetričnu matricu A, koristit ćemo notaciju $\lambda_k(A)$ za k-tu najveću svojstvenu vrijednost, odnosno

$$\lambda_n(A) \leq \cdots \leq \lambda_2(A) \leq \lambda_1(A).$$

Iz ortogonalne invarijantnosti 2-norme slijedi da A ima singularne vrijednosti $\{|\lambda_1(A)|, ..., |\lambda_n(A)|\}$ i

$$||A||_2 = max\{|\lambda_1(A)|, |\lambda_n(A)|\}.$$

Svojstvene vrijednosti simetrične matrice imaju "min-max" karatkerizaciju na temelju vrijednosti koje se mogu pretpostaviti kvadratnim omjerom oblika $x^T Ax/x^T x$.

Teorem 1.2.4 (Courant - Fischer Minmax teorem)**.** *Ako je* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *simetrična, tada vrijedi*

$$\lambda_k(A) = \max_{dim(S)=k} \min_{0\neq y\in S} \frac{y^T Ay}{y^T y}$$

za $k = 1, ..., n$.

Dokaz. Dokaz u [2]. □

Poglavlje 2

Lanczosov algoritam

Lanczosov algoritam postaje prihvaćen kao moćan alat za pronalaženje vlastitih vrijednosti matrice i za rješavanje linearnih sustava jednadžbi. Posljednjih godina postoji značajan interes za algoritam i njegovu aplikacije.
U ovom poglavlju opisujemo Lancozosov algoritam primijenjen na problem svojstvenih vrijednosti

$$Ax = \lambda x,$$

gdje je A realna simetrična matrica. Prvo ćemo proučiti izvođenje algoritma, zatim analizu pogreške i konvergenciju osnovne Lancozosve metode. Parlett [3] je dao detaljnu pogrešku analize jednostavnog Lanczosovog algoritma.
Važno i prilično iznenađujuće svojstvo je da algoritam, barem u egzaktnoj aritmetici, jamči da su vektori q_k, za $k = 1, 2, .., n$, ortogonalni. U stvarnosti, ortogonalnost tih vektora je očuvana samo na početku procesa. U konačnici, q_k vektori počinju vrlo brzo gubiti svoju ortogonalnost. Time dolazimo do pitanja kako vratiti ortogonalnost, to nas dovodi do Lanczosa s potpunom reortogonalizacijom, selektivnom reortogonalizacijom, i drugih.Vidi [2] [3]

2.1 Svojstva izvođenja i konvergencije metode

Pretpostavimo da je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ velika, rijetko popunjena i simetrična matrica. Zanimaju nas njezine ekstremne svojstvene vrijednosti. Problem možemo riješiti Lanczosovom metodom. Algoritam počinje s pravilno odabranim početnim vektorom q_1 i gradi ortogonalnu bazu Q_k Krylovljevog potprostora. Tada, na k-dimenzionalnom potprostoru generiranim kao slika Q_k, operator A je reprezentiran sa realnom simetričnom tridijagonalnom matricom T_k, čije su ekstremne svojstvene vrijednosti progresivno bolje procjene od ekstremnih svojstvenih vrijednosti od A kako dimenzija k raste. U ovoj cjelini izvodimo tehniku i istražujemo njena aritmetička svojstva.

Krylovljevi potprostori

Neka je $r(x) = \frac{x^T Ax}{x^T x}$, $x \neq 0$ Rayleighjev kvocijent. Courant-Fischer teorem nam daje maksimalnu i minimalnu vrijednost od $r(x)$, odnosno $\lambda_1(A)$ i $\lambda_n(A)$. Pretpostavimo da je $\{q_i\} \subseteq \mathbb{R}^n$ niz ortonormiranih vektora i definirajmo skalare M_k i m_k

$$M_k = \lambda_1(Q_k^T AQ_k) = \max_{y \neq 0} \frac{y^T(Q_k^T AQ_k)y}{y^T y} = \max_{\|y\|_2=1} r(Q_k y) \leq \lambda_1(A)$$
$$m_k = \lambda_k(Q_k^T AQ_k) = \min_{y \neq 0} \frac{y^T(Q_k^T AQ_k)y}{y^T y} = \min_{\|y\|_2=1} r(Q_k y) \geq \lambda_n(A)$$

gdje je $Q_k = [q_1, ..., q_k]$. Lanczosov algoritam možemo izvesti tako da razmatramo kako generirati q_k da M_k i m_k budu najbolje procjene za $\lambda_1(A)$ i $\lambda_n(A)$.
Pretpostavimo da je $u_k \in span\{q_1, ..., q_k\}$ takav da $M_k = r(u_k)$. Budući da $r(x)$ najbrže raste u smjeru gradijenta

$$\nabla r(x) = \frac{\nabla(x^T Ax)x^T x - x^T Ax\nabla(x^T x)}{(x^T x)^2} = \frac{2}{x^T x}(Ax - r(x)x),$$

možemo osigurati da je $M_{k+1} > M_k$ ako je q_{k+1} određen tako da je

$$\nabla r(u_k) \in span\{q_1, ..., q_{k+1}\} \tag{2.1}$$

(uz pretpostavku da je $\nabla r(u_k) \neq 0$.)
Također, ako $v_k \in span\{q_1, ..., q_k\}$ zadovoljava $r(v_k) = m_k$, onda ima smisla zahtijevati da

$$\nabla r(v_k) \in span\{q_1, ..., q_{k+1}\} \tag{2.2}$$

pošto $r(x)$ brzo pada u smjeru $-\nabla r(x)$.

Kako je $\nabla r(x) \in span\{x, Ax\}$, jasno je da (2.1) i (2.2) mogu istovremeno vrijediti ako

$$span\{q_1, ..., q_k\} = span\{q_1, Aq_1, ..., A^{k-1}q_1\}.$$

Gornja jednakost se dokaže pomoću matematičke indukcije po k i primjenom Gram-Schmidtovog algoritma dobivamo pripadnu ortonormiranu bazu.
Zatim, izaberemo q_{k+1} tako da vrijedi

$$span\{q_1, ..., q_k, q_{k+1}\} = span\{q_1, Aq_1, ..., A^{k-1}q_1, A^k q_1\}$$

To nas dovodi do računa ortonormirane baze Krylovljevog potprostora

$$\mathcal{K}(A, q_1, k) = span\{q_1, Aq_1, ..., A^{k-1}q_1\}.$$

Krylovljevi potprostori su slike Kyrilovljevih matrica

$$K(A, q_1, k) = [q_1, Aq_1, ..., A^{k-1}q_1].$$

Tridijagonalizacija

Kao što smo spomenuli u prethodnoj cjelini, moramo naći bazu Krylovljevih potprostora. Dakle, Lanczosov algoritam određuje ortonormiranu bazu $\{q_1, \ldots, q_k\}$ Krylovljevog prostora tako da, za $Q_k = [q_1, ..., q_k]$, $T_k = Q^T AQ$ je tridijagonalna.
Pretpostavimo da smo već izračunali ortonormiranu bazu $\{q_1, \ldots, q_k\}$ Krylovljevog prostora $\mathcal{K}(A, x, k)$. Tada $A^{k-1}x \in \text{span}\{q_1, \ldots, q_k\}$, pa za to postoje $\gamma_1, \ldots, \gamma_k \in \mathbb{R}$ takvi da

$$A^k x = A(A^{k-1}x) = A(\sum_{j=1}^{k} \gamma_j q_j) = \gamma_k A q_k + A(\sum_{j=1}^{k-1} \gamma_j q_j).$$

Pošto $q_1, \ldots, q_{k-1}$ razapinju $\mathcal{K}(A, x, k-1)$, a $A \cdot \mathcal{K}(A, x, k-1) = \mathcal{K}(A, x, k)$, drugi dio desne strane jednakosti se nalazi u $\mathcal{K}(A, x, k)$. Dakle, za računanje ortonormiranje baze $\mathcal{K}(A, x, k+1)$ dovoljno je izračunati ortonormirani komplement $u_k = Aq_k$ u odnosu na vektore $q_1 \ldots q_k$.
Pošto je $Aq_j \in \mathcal{K}(A, x, j+1) \subset \mathcal{K}(A, x, k-1)$ za svaki $j < k-1$, tada pošto je A simetrična matrica možemo zaključiti

$$(q_j)^T u_k = (q_j)^T A q_k = (Aq_j)^T q_k = 0.$$

Stoga, $(u_k)^T q_j = 0$ za $j = 1 \ldots k-2$, pa slijedi $Aq_k = \gamma_k q_{k+1} + \alpha_k q_k + \beta_{k-1} q_{k-1}$. Nadalje, koeficijenti se dobiju iz

$$\begin{aligned} \beta_{k-1} &= (q_{k-1})^T A q_k = (Aq_{k-1})^T q_k = \\ &= (\gamma_{k-1} q_k + \alpha_{k-1} q_{k-1} + \beta_{k-1} q_{k-2})^T q_k = \\ &= \gamma_{k-1} \end{aligned}$$

Dakle, $(u_k)^T q_j = 0$ za $j = 1, \ldots, k-2$, stoga slijedi

$$Aq_k = \beta_{k-1} q_{k-1} + \alpha_k q_k + \beta_k q_{k+1}, \quad \beta_0 q_0 = 0$$

za $k = 1, ..., n-1$.
Ortonormiranost od q_i povlači $\alpha_k = q_k^T A q_k$. Štoviše, ako je $r_k = (A - \alpha_k I) q_k - \beta_{k-1} q_{k-1}$ različit od nule, onda $q_{k+1} = r_k / \beta_k$ gdje je $\beta_k = \pm \|r_k\|_2$.
Ako je $r_k = 0$, onda se iteracija prekida no ne bez dobivanja vrijednih informacija o invarijantnom potprostoru.
Dolazimo tako do Lanczosove iteracije[2]:

Algorithm 1: Lanczosova iteracija

$r_0 = q_1; \beta_0 = 1; q_0 = 0; k = 0$
while $\beta \neq 0$ **do**
  $q_{k+1} = r_k/\beta_k; k = k + 1$
  $\alpha_k = q_k^T A q_k$
  $r_k = (A - \alpha_k I)q_k + \beta_{k-1}q_{k-1}$
  $\beta_k = \|r_k\|_2$
end while

Vektori q_k se zovu Lanczosovi vektori.

Greške i granice prekida

Iteracija se prekida prije nego se dovrši tridijagonalizacija ako je q_i sadržan u odgovarajućem invarijantnom podskupu. To je jedno od matematičkih svojstva koje ćemo opisati u sljedećem teoremu.

Teorem 2.1.1. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i pretpostavimo da $q_1 \in \mathbb{R}^n$ ima jediničnu vektorsku 2-normu. Tada Lanczosova iteracija (Algoritam 1) iterira sve dok $k = m$, gdje je $m = r(K(A, q_1, n))$.*
Štoviše, za $k = 1, ..., m$ imamo

$$AQ_k = Q_k T_k + r_k e_k^T \tag{2.3}$$

gdje je

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}$$

i $Q_k = [q_1, ..., q_k]$ čiji stupci čine ortonormiranu bazu od $\operatorname{span}\mathcal{K}(A, q_1, k)$.

Dokaz. Dokaz u [2] Teorem 9.1.1. str. 474. □

U Lanczosovoj iteraciji je dobrodošla situacija ako naletimo na $\beta_k = 0$ jer dovodi do egzaktnog izračuna invarijantnog potprostora.
Međutim, u praksi se rijetko kad dogodi da je β_k nula ili čak mali. Unatoč tome, ekstremne svojstvene vrijednosti od T_k su iznenađujuće dobre aproksimacije ekstremnih svojstvenih vrijednosti od A. Zbog toga, možemo tražiti druga objašnjenja za konvergenciju svojstvenih vrijednosti od T_k. Sljedeći rezultat je korak ka tome smjeru:

Teorem 2.1.2. *Pretpostavimo da je izvedeno k koraka Lanczosovog algoritma i neka je $S_k^T T_k S_k = diag(\theta_1, ..., \theta_k)$ Schurova dekompozicija od tridijagonalne matrice T_k.*
Ako je $Y_k = [y_1, ...y_k] = Q_k S_k \in \mathbb{R}^{n\times k}$, onda za $i = 1, ...k$ imamo

$$||Ay_i - \theta_i y_i||_2 = |\beta_k||s_{ki}|$$

gdje je $S_k = (s_{pq})$.

Dokaz. Pomnožimo izraz $AQ_k = Q_k T_k + r_k e_k^T$ sa S_k i jer je $Q_k S_k = Y_k$ i $S_k^T T_k S_k = diag(\theta_1, ..., \theta_k) \Rightarrow T_k S_k = S_k diag(\theta_1, ..., \theta_k)$, tada dobijemo

$$
\begin{aligned}
AQ_kS_k &= Q_kT_kS_k + r_ke_k^TS_k \\
\Rightarrow AY_k &= Y_k diag(\theta_1, ..., \theta_k) + r_ke_k^TS_k.
\end{aligned}
$$

pa je $Ay_i = \theta_i y_i + r_k(e_k^T S e_i)$. Do tvrdnje teorema dođemo računajući normu zadnje jednakosti i uz činjenicu da je $||r_k||_2 = |\beta_k|$. Dakle, slijedi da je

$$
||Ay_i - \theta_i y_i||_2 = ||r_k(e_k^T S e_i)||_2 = |\beta_k||s_{ki}|
$$

$\square$

Koristeći Teorem 2.1.2 moguće je izračunati ograničenje pogreške svojstvenih vrijednosti matrice T_k

$$
\min |\theta_i - \mu| \leq |\beta_k||s_{ki}|, \quad i = 1, \dots k.
$$

Primijetimo da Teorem 1.2.2 daje (θ_i, y_i) Ritzove parove potprostora linearne ljuske vektora od Q_k. Budući da je $|s_{ki}| \leq 1$, možemo zaključiti da veličina β_k govori o točnosti Ritzovih vrijednosti. Za $\beta_k = 0$ u Lanczosovom algoritmu imamo točne svojstvene vrijednosti.
Postoje drugi načini da se T_k može iskoristiti za procjenu svojstvenih vrijednosti od A, detaljnije o tome pročitajte u [2].

Konvergencija

Za razliku od nekih drugih metoda, Lanczosova metoda ne ovisi o pomacima jer $\mathcal{K}(A, q_1, k) = \mathcal{K}(A+\alpha I, q_1, k), \forall\alpha \in \mathbb{R}$. Dakle, prvo možemo očekivati konvergenciju Lanczosove metoda na ekstremne svojstvene vrijednosti.
Pretpostavimo da svojstvene vrijednosti matrice A i Ritzove vrijednosti za potrpostor $\mathcal{K}_k$ su posložene po veličini

$$
\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n, \quad \theta_1 \geq \theta_2 \geq \cdots \geq \theta_k.
$$

Tada min-max princip kaže (gdje S razapinje potprostor u $\mathbb{R}^k$, a $\tilde{S}$ razapinje u $\mathbb{R}^n$)

$$
\begin{aligned}
\theta_i^{(k)} &= \max_{dim(S)=i} \min_{0\neq y\in S} \frac{y^T T_k y}{y^T y} = \max_{dim(S)=i} \min_{0\neq y\in S} \frac{y^T Q_k^T A Q_k y}{y^T Q_k^T Q_k y} \\
&= \max_{dim(\tilde{S})=i, \tilde{S}\subset\mathcal{K}_k} \min_{0\neq x\in\tilde{S}} \frac{x^T A x}{x^T x} \leq \max_{dim(\tilde{S})=i, \tilde{S}\subset\mathcal{K}_{k+1}} \min_{0\neq x\in\tilde{S}} \frac{x^T A x}{x^T x} = \\
&= \theta_i^{(k+1)} \leq \max_{dim(\tilde{S})=i} \min_{0\neq x\in\tilde{S}} \frac{x^T A x}{x^T x} = \lambda_i
\end{aligned}
$$

gdje je $\theta_i^{(k)}$ Ritzova vrijednost iz k-iteracije, a $\theta_i^{(k+1)}$ iz $k+1$. Stoga je (konačan) niz $\{\theta_i^{(k)}\}_{k=i,i+1,i+2}$ monotono rastući i omeđen odozgora s λ_i. Isto tako, niz svojstvenih vrijednosti T_k monotono pada i odozdola je ograničen sa svojstvenom vrijednošću matrice A. Nadalje, prije nego dobijemo rezultate o brzini konvergencije Lanczosove metode, prvo ću iskazati par svojstava čije dokaze i detalje možete vidjeti u [4] i [5]. Prvi iskaz je za ogradu kuta svojstvenih vektora matrice A i Krylovljevog prostora $\mathcal{K}(A, q_1, k)$. Označimo sa $\mathcal{P}_{k-1}$ skup polinom stupnja $k-1$ i z_i sustav ortonormiranih svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenoj vrijednosti λ_i

Lema 2.1.3. *Neka je P_i ortogonalni projektor na svojstveni potprostor koji odgovara λ_i. Ako je $P_i q_1 \neq 0$, tada je*

$$\tan\phi(z_i, \mathcal{K}_k) = \min_{p\in\mathcal{P}_{k-1}, p(\lambda_i)=1} \|p(A)y_i\|_2 \tan\delta(q_1, z_i)$$

gdje je

$$y_i = \begin{cases} \frac{(I-P_i)q_1}{\|(I-P_i)q_1\|_2} & ,(I-P_i)q_1 \neq 0 \\ 0 & ,\textit{inače.} \end{cases}$$

Dokaz. Dokaz možete naći u [4]. □

Umetanjem bilo kojeg polinoma stupnja $k-1$ koji zadovoljava $p(\lambda_i) = 1$ dobiva se gornja ograda za $\tan\phi(z_i, \mathcal{K}(A, q_1, k))$.

Definicija 2.1.4. *Chebyshejevi polinomi su definirani sa*

$$c_k(t) := \cos(k \cdot \arccos t), \quad |t| \leq 1, k \in \mathbb{N} \cup 0$$

Nabrojimo neka svojstva Chebyshejevog polinoma.

Lema 2.1.5. 1. *Chebyshevijev polinom zadovoljava rekurzivnu formulu*

$$c_0(z) = 1, c_1(z) = t, c_{k+1}(z) = 2zc_k(z) - c_{k-1}(z).$$

Ti polinomi su ograničeni na segmentu $[-1, 1]$ *(rastu jako brzo izvan tog intervala). Posebno, c_k je polinom stupnja $k \geq 1$.*

2. *za $|z| \geq 1$, Chebyshejev polinom je oblika*

$$c_k(z) = \cosh(k \cdot \operatorname{Arcosh} z), \quad z \in \mathbb{R}, |z| \geq 1.$$

Dokaz. [4] □

Detaljniju teoriju i svojstva možete naći u [5] i [4]. Iskažimo sada teorem koji govori o Kaniel- Paigeovoj teoriji konvergencije[2].

Teorem 2.1.6. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična matrica sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$ i odgovarajućim svojstvenim vektorima $z_1, \ldots, z_n$.*
Ako $\theta_1 \geq \cdots \geq \theta_k$ su svojstvene vrijednosti od matrice T_k dobivene nakon k koraka Lanczosove iteracije, tada

$$\lambda_1 \geq \theta_1 \geq \lambda_1 - \frac{(\lambda_1 - \lambda_n)\tan(\phi_1)^2}{(c_{k-1}(1 + 2\rho_1))^2}$$

gdje je $\cos(\phi_1) = |q_1^T z_1|$, $\rho_1 = (\lambda_1 - \lambda_2)/(\lambda_2 - \lambda_n)$, i $c_{k-1}(x)$ je Chebyshejev polinom $k-1$ stupnja.

Dokaz. Prema teoremu o min-max principu imamo:

$$\begin{aligned}\theta_1 &= \max_{y\neq 0} \frac{y^T T_k y}{y^T y} = \max_{y\neq 0} \frac{(Q_k y)^T A (Q_k y)}{(Q_k y)^T (Q_k y)} = \\ &= \max_{0\neq w\in\mathcal{K}(A,q_1,k)} \frac{w^T A w}{w^T w}\end{aligned}$$

Pošto je λ_1 maksimalna vrijednosti od $\frac{w^T A w}{w^T w}$, za sve ne nul w, slijedi $\lambda_1 \geq \theta_1$.
Za donju granicu od θ_1 primijetimo da je

$$\theta_1 = \max_{p\in\mathcal{P}_{k-1}} \frac{q_1^T p(A) A p(A) q_1}{q_1^T p(A)^2 q_1}$$

gdje je $\mathcal{P}_{k-1}$ skup polinoma stupnja $k-1$.
Ako je $q_1 = \sum_{i=1}^n d_i z_i$, onda

$$\begin{aligned}\frac{q_1^T p(A) A p(A) q_1}{q_1^T p(A)^2 q_1} &= \frac{\sum_{i=1}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2 \lambda_i}{\sum_{i=1}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2} \geq \\ \geq \lambda_1 - (\lambda_1 - \lambda_n) &\frac{\sum_{i=2}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2}{d_1^2 p(\lambda_1)^2 + \sum_{i=2}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2}\end{aligned}$$

Možemo donju ogradu još smanjiti tako da odaberemo polinom $p(x)$ takav da je vrijednost velika za $x = \lambda_1$ u usporedbi sa ostalim svojstvenim vrijednostima. Jedan način je da stavimo

$$p(x) = c_{k-1}(-1 + 2\frac{x - \lambda_n}{\lambda_2 - \lambda_n})$$

gdje je $c_{k-1}(z)$ Chebyshevijev polinom stupnja $k-1$. Tada za $\lambda_i, i = 2, \ldots, n$, $\lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$, i $f(x) = -1 + 2\frac{x-\lambda_n}{\lambda_2-\lambda_n}$ za koje vrijedi $f(\lambda_2) = 1$ i $f(\lambda_n) = -1$, odnosno $f(\lambda_i) \in [-1, 1]$, slijedi da je $|p(\lambda_i)|$, $i = 2, \ldots, n$ ograničen jedinicom, a $p(\lambda_1) = c_{k-1}(-1 + 2\frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_2-\lambda_n}) = c_{k-1}(\frac{2\lambda_1-\lambda_2-\lambda_n}{\lambda_2-\lambda_n}) =$

$c_{k-1}(\frac{\lambda_2-\lambda_n+2\lambda_1-2\lambda_2}{\lambda_2-\lambda_n}) = c_{k-1}(1+2\rho_1)$. Tada slijedi

$$\begin{aligned}\theta_1 &\geq \lambda_1 - (\lambda_1 - \lambda_n)\frac{\sum_{i=2}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2}{d_1^2 p(\lambda_1)^2 + \sum_{i=2}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2} \\ &\geq \lambda_1 - (\lambda_1 - \lambda_n)\frac{\sum_{i=2}^n d_i^2 p(\lambda_i)^2}{d_1^2 p(\lambda_1)^2} \\ &= \lambda_1 - (\lambda_1 - \lambda_n)\frac{1-d_1^2}{d_1^2}\frac{1}{c_{k-1}(1+2\rho_1)^2}.\end{aligned}$$

i jer je $d_1 = q_1^T z_1 = \cos(\phi_1)$ (to je zbog toga što su oba vektora norme 1, a z_i čine ortonormiranu bazu) slijedi, za $\tan(\phi_1)^2 = (1-d_1^2)/d_1^2$, tvrdnja teorema. □

Korolar 2.1.7. *Koristeći istu notaciju kao teorem vrijedi*

$$\lambda_n \leq \theta_k \leq \lambda_n + \frac{(\lambda_1 - \lambda_n)\tan(\phi_n)^2}{(c_{k-1}(1+2\rho_n))^2}$$

gdje je $\rho = (\lambda_{n-1} - \lambda_n)/(\lambda_1 - \lambda_{n-1})$ *i* $cos(\phi_n) = q_n^T z_n$.

Dokaz. Analogno kao Teorem 2.1.6 gdje A zamijenimo sa $-A$. □

2.2 Postupak praktične Lanczosove metode

Bilo koji praktični Lanczosov postupak mora se baviti problemima stvorenim gubicima u ortogonalnosti Lanczosovih vektora koja se može dogoditi kada se Lanczosova iteracija implementiran na računalu. Takvi gubici u ortogonalnosti utječu na odnose između svojstvenih vrijednosti generiranih tridijagonalizacijom matrica T_k i svojstvenih vrijednosti A. Kako se k povećava pojavljuju se dodatne svojstvene vrijednosti, običnoo zvane duhovi. Te dodatne svojstvene vrijednosti nastaju isključivo zbog gubitaka u ortogonalnosti Lanczosovih vektora.
Zbog Householderove savršene tridijagonalizacije, Lanczosova metoda je zanemarena sve do pojave Kainel-Paigeove teorije i sa razvojem računala povećala se mogućnost rješavanja svojstvenog problema velikih i rijetko popunjenih matrica. Sa manje nego potrebnih tipično n-iteracija za dobru aproksimaciju ekstremnih svojstvenih vrijednosti, Lanczosova metoda je postala privlačna za rijetko popunjene matrice, a ne konkurencija Householderovom pristupu.

Implementacija egzaktne aritmetike

Ako proučimo Lanczosovu iteraciju i alterativnu formulu

$$\alpha_k = q_k^T(Aq_k - \beta_{k-1}q_{k-1})$$

cijeli Lanczosov proces se može proizvesti pomoću samo dva pohranjena n-vektora. Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična matrica i $w \in \mathbb{R}^n$ ima jediničnu vektorsku 2-normu. Sljedeći algoritam računa $k \times k$ simetričnu tridijagonalnu matricu T_k takvu da vrijedi da je $\lambda(T_k) \subseteq \lambda(A)$. Pretpostavimo da postoji funkcija $A.multi(w)$ koja vraća matrično-vektorski produkt Aw. Dijagonalni, odnosno subdijagonalni elementi od T_k su spremljeni u $\alpha(1;k)$, odnosno $\beta(1;k-1)$.

Algorithm 2: Lanczosov algoritam

$v(1:n) = 0; \quad \beta_0 = 1; \quad k = 0$
while $\beta_k \neq 0$ **do**
  if $k \neq 0$ **then**
    for $i = 1:n$ **do**
      $t = w_i; \quad w_i = \frac{v_i}{\beta_k}; \quad v_i = -\beta_k t$
    end for
  end if
  $v = v + A.multi(w)$
  $k = k+1; \quad \alpha_k = w^T v; \quad v = v - \alpha_k w$
  $\beta_k = ||v||_2$
end while

Primijetimo da se tokom cijelog Algoritma 2[2] A ne mijenja, samo se koristi u funkciji A.multi() gdje se računa matrično-vektorski produkt. Ne računajući množenje matrice-vektora, svaka iteracija izvodi $O(n)$ aritmetičkih operacija. Ako A po retku ima prosječno d ne-nul vrijednosti, tada množenje matrice-vektora može se izvesti u $O(dn)$ aritmetičkih operacija. Ukupna složenost je tada $O(dkn)$ ili $O(n^2)$, ako je $k = n$. Dakle, Lanczosova metoda može biti vrlo brza za rijetke matrice. Lanczosovi vektori se spremaju u w. Pri kraju algoritma, svojstvene vrijednosti od T_k se mogu pronaći pomoću simetričnog tridijagonalnog QR algoritma ili neke slične metode.

Svojstvo zaokruživanja

Zahvaljujući temeljnim analizama pogreška, razvila se praktična Lanczosova metoda koja se može lako koristiti. Analizom rezultat ćemo doći do modificiranih Lancozovih metoda koje ćemo zatim proučiti.

Nakon j-tog koraka algoritma provedenog u aritmetici računala dobivamo matricu generiranu izračunatim Lancosovim vektorima $\hat{Q}_k = [\hat{q}_1, ..., \hat{q}_k]$ i pridruženu tridijagonalnu matricu

$$\hat{T}_k = \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_1 & \hat{\beta}_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hat{\beta}_1 & \hat{\alpha}_2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \hat{\beta}_{k-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \hat{\beta}_{k-1} & \hat{\alpha}_k \end{bmatrix}$$

[2] se pozvao na Paige gdje je pokazano da ako $\hat{r}_k$ računamo analogno kao r_k, onda

$$A\hat{Q}_k = \hat{Q}_k T_k + \hat{r}_k e_k^T + E_k, \tag{2.4}$$

gdje je

$$||E_k||_2 \approx u||A||_2. \tag{2.5}$$

Dakle, jednadžba $AQ_k = Q_k T_k + r_k e_k^T$ je zadovoljena do određene preciznosti. Dok normalizacija kod Lanczosovih vektora $\hat{q}_i$ nije problem, naime izračunati vektori su uglavnom jedinični,ortogonalnost počnu gubiti.
Ako je $\hat{\beta}_k = fl(||\hat{r}_k||_2)$ i izračunamo $\hat{q}_{k+1} = fl(\hat{r}_k/\hat{\beta}_k)$ (sa $fl(\cdot)$ označavamo tzv *engl. floating point*), onda jednostavnom analizom pokazujemo da $\hat{\beta}_k\hat{q}_{k+1} \approx \hat{r}_k + w_k$, gdje je $||w_k||_2 \approx u||\hat{r}_k||_2 \approx u||A||_2$. Dakle, možemo zaključiti da je

$$|\hat{q}_{k+1}^T \hat{q}_i| \approx \frac{|\hat{r}_k^T \hat{q}_i| + u||A||_2}{|\hat{\beta}_k|}$$

za $i = 1, \ldots, k$. Drugim riječima, značajna odstupanja od ortogonalnosti mogu se očekivati kada je $\hat{\beta}_k$ mali, čak i u idealnoj situaciji gdje je $\hat{r}_k^T \hat{Q}_k$ nula. Mali $\hat{\beta}_k$ implicira kraćenje u računanju $\hat{r}_k$. Dakle, gubitak ortogonalnosti je posljedica tog kraćenja i nije rezultat postupnog nakupljanja pogreške zaokruživanja.
U praksi se uvijek događa gubitak ortogonalnosti, a s njim i pogoršanje kvalitete svojstvenih vrijednosti T_k, to je vidljivo kombiniranjem (2.4) i Teorema 1.2.3. Ako u tom teoremu stavimo da je $F_1 = \hat{r}_k e_k^T + E_k$, $X_1 = \hat{Q}_k$, $S = \hat{T}_k$ i pretpostavimo da je $\tau = ||\hat{Q}_k^T \hat{Q}_k - I_l||_2 < 1$, tada postoje svojstvene vrijednosti $\mu_1, \ldots, \mu_k \in \lambda(A)$ takve da

$$|\mu_i - \lambda_i(T_k)| \leq \sqrt{2}(||\hat{r}_k||_2 + ||E_k||_2 + \tau(2+\tau)||A||_2)$$

za $i = 1, ..., k$. Očigledno način kontrole faktora τ je ortogonalizacija svakog novog izračunatog Lanczosovog vektora u odnosu na njegove prethodnike.

Lanczos s potpunom reortogonalizacijom

Neka su $r_0, ...r_{k-1} \in \mathbb{R}^n$ i pretpostavimo da su Householderove matrice $H_0, ..., H_{k-1}$ dobivene tako da je $(H_0 \cdots H_{k-1})^T [r_0, ..., r_{k-1}]$ gornjetrokutasta.
Označimo sa $[q_1, ..., q_k]$ prvih k stupaca Householderovog produkta $(H_0 \cdots H_{k-1})$. Sada pretpostavimo da nam je dan vektor $r_k \in \mathbb{R}^n$ i želimo izračunati jedinični vektor q_{k+1} u smjeru

$$w = r_k - \sum_{i=1}^{k} (q_i^T r_k) q_i \in span\{q_1, ..., q_k\}^\perp .$$

Ako se odredi Householderova matrica H_k takva da je $(H_0 \dots H_k)^T [r_0, ..., r_k]$ gornjetrokutasta onda slijedi da stupac $(k+1)$ od $H_0 \cdots H_k$ je tražen jedinični vektor.
Ako te izračunate Householderove matrice uvrstimo u Lanczosovu metodu, tada možemo izračunati Lanczosove vektore koji su ortogonalni do strojne preciznosti.[2]

$r_0 = q_1$; Dani jedinični vektor
Odredimo Householder H_0 takav da je $H_0 r_0 = e_1$ i $\beta_0 q_0 = 0$
for $k = 1 : n-1$ **do**
  $r_k = (A - \alpha_k I) q_k - \beta_{k-1} q_{k-1}$
  $w = (H_{k-1} \cdots H_0) r_k$
  Odredimo Householder H_k tako da
  $H_k w = (w_1, ..., w_k, \beta_k, 0, ...0)^T$
  $q_{k+1} = H_0 \cdots H_k e_{k+1}$;
  $\alpha_{k+1} = q_{k+1}^T A q_{k+1}$
end for

Dakle, ovo je jedan od primjera potpune reortogonalizacije Lanczosove sheme.
Dobiveni $\hat{q}_i$ iz gornjeg algoritma su ortogonalni do određene preciznosti zbog svojstva zaokruživanja Housholderove matrice. Primijetimo da zbog definicije od q_{k+1} nema nikakve razlike ako je $\beta_k = 0$. Zbog toga, algoritam se može sigurno izvoditi do $k = n-1$, međutim, u praksi bi se izvršilo za mnogo manje vrijednosti k.
Naravno, u bilo kojoj implementaciji gornjeg algoritma pohranjuje se Householderov vektor v_k i nikada se ne formira eksplicitno H_k. Budući da vrijedi $H_k(1 : k, 1 : k) = I_k$, nema potrebe računati prvih k komponenta od $w = (H_{k-1}, \dots, H_0) r_k$, jer u egzaktnoj aritmetici bi te komponente bile nula.
No i ta ekonomičnost čini samo mali trag u trošku računalnog vremena (engl. Overhead) povezanim s potpunom reortogonalizacijom. Računanje Householderovih reflektora povećava rad u k-tom Lanczosovom koraku za $O(kn)$. Štoviše, da bi se izračunao q_{k+1} mora se pristupiti Householderovim vektorima povezanim sa $H_0, \dots, H_k$.
Za velike n i k to obično predstavlja visoku količinu podataka, dakle, postoji visoka cijena za potpunu reortogonalizaciju. No, postoje i učinkovitiji načini, stoga je potrebno proučiti dublje kako se gubi ortogonalnost. I to nas dovodi do selektivne ortogonalizacije.

Selektivna ortogonalizacija

Posljedica analize pogreške je da gubitak ortogonalnosti ide ruku pod ruku s konvergencijom Ritzovog para. Preciznije, pretpostavimo da se simetrični QR algoritam primjeni na $\hat{T}_k$ i imamo izračunate Ritzove vrijednosti $\hat{\theta}_1, \ldots, \hat{\theta}_k$ i gotovo ortogonalnu matircu generiranu svojstvenim vektorima $\hat{S}_k = (\hat{s}_{pq})$. Ako je $\hat{Y}_k = [\hat{y}_1, \ldots, \hat{y}_k] = fl(\hat{Q}_k \hat{S}_k)$, tada se može pokazati da, za $i = 1, \ldots, k$, imamo

$$|\hat{q}_{k+1}^T \hat{y}_i| \approx \frac{u\|A\|_2}{|\hat{\beta}_k||\hat{s}_{ki}|} \tag{2.6}$$

i

$$\|A\hat{y}_i - \hat{\theta}_i \hat{y}_i\|_2 \approx |\hat{\beta}_k||\hat{s}_{ki}|. \tag{2.7}$$

Odnosno, najnoviji izračunati Lanczosov vektor $\hat{q}_{k+1}$ skloni su imati netrivijalnu i neželjenu komponentu u smjeru bilo kojeg već iskonvergiranog Ritzovog vektora. Posljedica toga je umjesto da ortogonaliziramo $\hat{q}_{k+1}$ u smjeru svih ranije izračunatih Lanczosovih vektora, možemo postići isti rezultat ortogonalizirajući u smjeru iskonvergiranih Ritzovih vektora koji čine mnogo manji skup u odnosu na Lanczosove vektore.
Praktična metoda provođenja ortogonalnosti raspisana je kod Parletta [3], gdje izračunati Ritzov par $(\hat{\theta}, \hat{y})$ se naziva *"dobar"* ako zadovoljava

$$\|A\hat{y} - \hat{\theta}\hat{y}\|_2 \approx \sqrt{u}\|A\|_2$$

Čim se izračuna $\hat{q}_{k+1}$ ortogonalizira se u smjeru svakog *"dobrog"* Ritzovog vektora.
Jedan od načina provedbe selektivne ortogonalizacije je dijagonalizacija $\hat{T}_k$ u svakom koraku i zatim ispitivanje $\hat{s}_{ki}$ u odnosu na (2.6) i (2.7).Učinkovitije je pristup procjene mjere gubitka ortogonalnosti $\|I_k - \hat{Q}_k^T \hat{Q}_k\|_2$ koristeći sljedeći rezultat

Lema 2.2.1. *Pretpostavimo da je $S_+ = [S\, d]$ gdje je $S \in \mathbb{R}^{n \times k}$ i $d \in \mathbb{R}^n$. Ako S zadovoljava $\|I_k - S^T S\|_2 \leq \mu$ i $|1 - d^T d| \leq \delta$, tada $\|I_{k+1} - S_+^T S_+\|_2 \leq \mu_+$ gdje je*

$$\mu_+ = \frac{1}{2}(\mu + \delta + \sqrt{(\mu - \delta)^2 + 4\|S^T d\|_2^2}).$$

Dokaz. Dokaz u [2]. □

Dakle, ako imamo ogradu za $\|I_k - \hat{Q}_k^T \hat{Q}_k\|_2$ i primjenjujući Lemu 2.2.1. za $S = \hat{Q}_k$ i $d = \hat{q}_{k+1}$, tada možemo generirati ogradu za $\|I_{k+1} - \hat{Q}_{k+1}^T \hat{Q}_{k+1}\|_2$. Sada je $\delta \approx u$ i pretpostavimo da je $\hat{q}_{k+1}$ ortogonaliziran prema skupu trenutno *dobrih* Ritzovih vektora. Možemo procijeniti normu $\hat{Q}_k^T \hat{q}_{k+1}$ iz jednostavne rekurzije koje štedi potrebu za pristupom $\hat{q}_1, \ldots, \hat{q}_k$. Trošak je minimalan, a kada ograde signaliziraju gubitak ortogonalnosti vrijeme je za razmatranje povećanja skupa dobrih Ritzovih vektora i tada i samo tada se $\hat{T}_k$ dijagonalizira. Detaljniju analizu i algoritam u [3].

Problem duhova svojstvenih vrijednosti

Istraživanje da se razvije Lanczosova metoda koja ne uključuje nikakvu vrstu provođenja ortogonalnosti se fokusira na problem tzv. duhova svojstvenih vrijednosti. To su višestruke svojstvene vrijednosti T_k koje odgovaraju jednostavnoj svojstvenoj vrijednosti A. One nastaju jer se iteracije iz početka pokreću kada se izgubi ortogonalnost konvergentnog Ritzovog vektora.

Poglavlje 3

Arnoldijev algoritam

3.1 Hessenbergova dekompozicija

QR faktorizacija, koja se pojavljuje u iteracijama QR algoritma za dobivanje Schurove dekompozicije, je dosta skupa budući da svaki korak zahtjeva faktorizaciju cijele $n \times n$ matrice. Želimo li ostvariti veću efikasnost algoritma, prvo moramo naći strukturu matrice koja je sačuvana QR algoritmom, te na taj način smanjiti trošak jednog koraka iteracije. Tako dolazimo do Hessenbergove matrice H koja se može dodatno reducirati na trokutastu matricu pomoću QR faktorizacije sa pomakom, a za koju se QR faktorizacija efikasnije računa. Uočavamo da je u svakom koraku iteracije produkt gornje trokutaste matrice R i Hessenbergove martice H nova Hessenbergova matrica. Odnosno, QR iteracija $H_{k+1} = Q_k^T H_k Q_k$ je transformacija unuarnje sličnosti između dvije Hessenbergove matrice, što rezultira manjim brojem aritmetičkih operacija algoritma. Detaljnije o Hessenbergovoj dekompoziciji i QR algoritmu možete vidjeti u [1] i [2].

3.2 Arnoldi i nesimetrični Lanczos

Ako je A nesimetrična matrica, onda ortogonalna tridijagonalizacija $Q^T A Q = T$ generalno ne postoji. Možemo nastaviti na dva načina.
Prvi je Arnoldijev pristup koji generira stupac po stupac ortogonalne matrice Q tako da je $Q^T A Q = H$, gdje je H Hessenbergova matrica.
Drugi pristup je nesimetrična Lancozova metoda. Ona računa stupce od $Q = [q_1, ...q_n]$ i $P = [p_1, ..., p_n]$ takve da $P^T A Q = T$ tridijagonalna i $P^T Q = I_n$.
Obje metode su zanimljive za računanje svojstvenih vrijednosti za velike, rijetko popunjene nesimetrične matrice.

Osnovna Arnoldijeva iteracija

Promotrimo Hessenbergovu dekompoziciju $Q^T AQ = H$, gdje je $Q^T Q = I$.
Ako je $Q = [q_1, ..., q_n]$, tada k-ti stupac u $AQ = QH$ izgleda

$$Aq_k = \sum_{i=1}^{k+1} h_{ik} q_i, \quad 1 \leq k \leq n-1.$$

Izlučimo li zadnji član u sumi dobivamo

$$h_{k+1,k} q_{k+1} = Aq_k - \sum_{i=1}^{k} h_{ik} q_i := r_k,$$

gdje je $h_{ik} = q_i^T Aq_k$ za $i = 1, ..., k$.
Ako je $r_k \neq 0$, onda q_{k+1} je definiran sa

$$q_{k+1} = \frac{r_k}{h_{k+1,k}},$$

gdje je $h_{k+1,k} = \|r_k\|_2$. Uz pretpostavku da je zadan q_1, $\|q_1\|_2 = 1$, ove jednadžbe definiraju Arnoldijevu metodu i analogno kao sa simetričnom Lanczosovom iteracijom dobivamo:

$r_0 = q_1$;
$h_{10} = 1$
$k = 0$
while $h_{k+1,k} \neq 0$ **do**
  $q_{k+1} = r_k / h_{k+1,k}$
  $k = k + 1$
  $r_k = Aq_k$
  for $i = 1 : k$ **do**
    $h_{ik} = q_i^T r_k$
    $r_k = r_k - h_{ik} q_i$
  end for
  $h_{k+1,k} = \|r_k\|_2$
end while

Tada se q_k zovu Arnodlijevi vektori i definiraju ortonormiranu bazu za Krylovljev potprostor $\mathcal{K}(A, q_1, k) = span\{q_1, Aq_1, ..., A^{k-1} q_1\}$, odnosno

$$span\{q_1, q_2, ..., q_k\} = span\{q_1, Aq_1, ..., A^{k-1} q_1\}. \tag{3.1}$$

Nakon k-tog koraka, Arnoldijeva metoda se može zapisati u kompaktnom obliku kao

$$AQ_k = Q_k H_k + r_k e_k^T \tag{3.2}$$

gdje je $Q_k = [q_1, ..., q_k], \quad e_k = I_k(:, k)$ i

$$H_k = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & \cdots & h_{2k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & h_{k,k-1} & h_{kk} \end{bmatrix}$$

Ako je $r_k = 0$, onda stupci od Q_k definiraju invariantan potprostor i $\lambda(H_k) \subseteq \lambda(A)$. Inače, zanima nas kako izvući informacije o sustavu svojstvenih vrijednosti od A iz Hessenbergove matrice H_k i matrice Q_k čiji su stupci Arnoldijevi vektori.
Ako je $y \in \mathbb{R}^k$, $\|y\|_2 = 1$ svojstveni vektor od H_k i $H_k y = \lambda y$, onda iz (3.2) slijedi

$$(A - \lambda I)x = (e_k^T y) r_k,$$

gdje je $x = Q_k y$.Tada λ zovemo Ritzova vrijednost i x pripadajući Ritzov vektor. Veličina od $|e_k^T y| \|r_k\|_2$ se može koristiti za dobivanje ograde pogreške, iako relativni perturbacijski teoremi nisu tako rutinski za primijeniti kao u simetričnom slučaju.
Isto kao u simetričnom slučaju problem je gubitak ortogonalnosti kod q_i. No, prije nego što možemo dobiti praktični Arnoldijev postupak za rješavanje sustava svojstvenih vrijednosti, dva svojstva se trebaju riješiti:

1. Za velike matrice A Arnoldijeva metoda postaje skupa u smislu pohrane i operacija. Moramo pohraniti k vektora duljine n i Hessenbergovu matricu $k \times k$. Dakle, ima $O(kn)$ aritmetičkih operacija.

2. Svojstvene vrijednosti H_k ne aproksimiraju svojstvene vrijednosti A u stilu Kaniel i Paige, što je suprotno u odnosu na simetrični slučaj gdje informacije o ekstremnim svojstvenim vrijednostima matrice A se pojave brzo. Kod Arnoldija, rane informacije o svojestvenim vrijedostima ovisi o izboru q_1.

Ovo nas potiče da uvedemo Arnoldija s restartom (Resetirani Arnoldi), sa pažljivo odabranim restartom i kontrolom maksimalnog broja iteracija.

Restartani Arnoldi

Ova sekcija je rađena prema [2] gdje je detaljno opisan restartani Arnoldijev algoritam. Razmotrimo situaciju kada Arnoldijev algoritam izvrši m iteracija, tada ponovimo proces sa novim početnim vektorom $q_+ \in span\{q_1, .., q_m\}$, gdje su $q_1, .., q_m$ Arnoldijevi vektori.
Zbog povezanosti sa Krylovljevim prostorom (3.1), q_+ je oblika

$$q_+ = p(A) q_1$$

za neki polinom p stupnja $m-1$.
Ako $Av_i = \lambda v_i$, za $i = 1, ..., n$ i q_1 ima rastav po svojstvenim vektorima

$$q_1 = a_1 v_1 + ... + a_n v_n,$$

tada

$$q_+ = a_1 p(\lambda_1) v_1 + ... + a_n p(\lambda_n) v_n.$$

Primijetimo da $\mathcal{K}(A, q_+, m)$ je bogat sa svojstveni vektorima koji imaju veliku vrijednost $p(\lambda)$. Odnosno, ako $p(\lambda_{da})$ je veliki u odnosnu s $p(\lambda_{ne})$, onda Krylovljev prostor $\mathcal{K}(A, q_+, m)$ će imati puno bolju aproksimaciju svojstvenog vektora x_{da}, nego svojstvenog vektora x_{ne}. Mi ćemo opisati metodu koja implicitno određuje restartani vektor koristeći QR iteracije sa shiftom (pomakom). Restart se pojavljuje nakon svakih m koraka i pretpostavimo da je $m > j$, gdje je j broj traženih vektora.
Odabir za parametar m ovisi o dimenziji n, o učinku gubitka ortogonalnosti i ograničenjem pohrane sustava.
Nakon m koraka imamo Arnoldijevu faktorizaciju

$$AQ_T = Q_T H_T + r_T e_m^T, \tag{3.3}$$

gdje $Q_T \in \mathbb{R}^{n\times m}$ ima ortonormirane stupce, $H_T \in \mathbb{R}^{m\times m}$ je gornja Hessenbergova matrica i $Q_T^T r_T = 0$. (T je skraćenica za "trenutni".) Tada, QR iteracije sa shiftom se primjenjuje na H_T :

$H^{(1)} = H_T$
for $i = 1 : p$ **do**
  $H^{(i)} - \mu_i I = V_i R_i$
  $H^{(i+1)} = R_i V_i + \mu_i I$
end for
$H_+ = H^{(p+1)}$

za $p = m - j$.
Nabrojimo prvo tri bitna svojstva ortogonalne matrice $V = V_1 \cdots V_p$:

1. $H_+ = V^T H_T V$. Vrijedi zbog $V_i^T H^{(i)} V_i = H^{(i+1)}$

2. $[V]_{mi} = 0$ za $i = 1, \dots, j-1$. Vrijedi jer svaka matrica V_i je Hessenbergova matrica i $V \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ima $p = m - j$ donjih sporednih dijagonala.

3. Prvi stupac od V je oblika

$$Ve_1 = \alpha (H_T - \mu_p I)(H_T - \mu_{p-1} I) \cdots (H_T - \mu_1 I) e_1,$$

za neki skalar α.

Da se uvjerimo u svojstvo 3., pogledajmo slučaj za $p = 2$:

$$\begin{aligned} VR_2R_1 &= V_1(V_2R_2)R_1 = V_1(H^{(2)} - \mu_2 I)R_1 = \\ &= V_1(V_1^T H^{(1)} V_1 - \mu_2 I)R_1 = \\ &= (H^{(1)} - \mu_2 I)V_1R_1 = \\ &= (H^{(1)} - \mu_2 I)(H^{(1)} - \mu_1 I) = \\ &= (H_T - \mu_2 I)(H_T - \mu_1 I) \end{aligned}$$

Budući da je R_2R_1 gornjetrokutasta, prvi stupac od $V = V_1V_2$ je višekratnik prvog stupca od $(H_T - \mu_2 I)(H_T - \mu_1 I)$. Sada ćemo pokazati kako restartati Arnoldijev proces kada se implicitno odabire početni vektor pomoću matrice V.
Iz svojstva 1. slijedi transformacija (3.3)

$$AQ_+ = Q_+H_+ + r_T e_m^T V,$$

gdje je $Q_+ = Q_T V$.(Detaljniji raspis u [4].) Ovo nije nova Arnoldijeva faktorizacija duljine m jer $e_m^T V$ nije višekratnik od e_m^T. Međutim, uz uvjet $H_+(j+1, j) = 0$ koji vrijedi za izbor shiftova koje će kasnije biti opisani i zbog svojstva 2. dobivamo

$$AQ_+(:, 1:j) = Q_+(:, 1:j)H_+(1:j, 1:j) + v_{mj} r_T e_j^T, \tag{3.4}$$

Arnoldijevu faktorizaciju duljine j. H_+ je također Hessenbergova matrica, što se može pokazati za takav zbor shiftova.
Sada osnovnu Arnoldijevu iteraciju krenemo od koraka $j+1$ i izvedemo p koraka, tada (3.4) možemo proširiti na novu Arnoldijevu faktorizaciju duljine m.
Štoviše, koristeći svojstvo 3., pridruženi početni vektor vektor $q_1^{(novi)} = Q_+(:, 1)$ ima karakterizaciju:

$$\begin{aligned} Q_+(:, 1) &= Q_T V e_1 = \alpha Q_T (H_T - \mu_p I) \cdots (H_T - \mu_Q I) e_1 \\ &= \alpha (A - \mu_p I) \cdots (A - \mu_I) Q_T e_1 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Zadnja jednakost slijedi iz svojstva

$$(A - \mu I)Q_T = Q_T(H - \mu I) + r e_m^T$$

i činjenice da je $e_m^T f(H_T) e_1 = 0$, za polinom $f(\cdot)$ stupnja $p-1$ ili manje.
Dakle, $q_1^{(novi)} = p(A) q_1$ gdje je $p(\lambda)$ polinom

$$p(\lambda) = (\lambda - \mu_1)(\lambda - \mu_2) \cdots (\lambda - \mu_p)$$

Slijedi da su shiftovi (pomaci) QR faktorizacije nultočke filtrirajućeg polinoma,a najbolji izbor je da se te nultočke poklapaju sa svojstvenim vrijednostima od H_T koje ne želimo. Pokazali smo izvođenje implicitne resetirane Arnodlijeve metode.

Nesimetrična Lanczosova tridijagonlizacija

Također, rađeno po [2]. Drugi način za proširenje simetričnog Lanczosovog procesa je da reduciramo A do tridijagonalnog oblika koristeći generalno sličnu transformaciju. Pretpostavimo da je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i postoji nesingularna matrica Q takva da

$$Q^{-1}AQ = T = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \gamma_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

Uspoređujući stupce od $AQ = QT$ i $A^TP = PT^T$, gdje smo particioniranjem stupaca dobili

$$\begin{aligned} Q &= [q_1, ..., q_n] \\ Q^{-1} = P &= [p_1, ..., p_n] \end{aligned}$$

vidimo da vrijedi

$$\begin{aligned} Aq_k &= \gamma_{k-1}q_{k-1} + \alpha_k q_k + \beta_k q_{k+1}, \quad \gamma_0 q_0 \equiv 0 \\ A^T p_k &= \beta_{k-1}p_{k-1} + \alpha_k p_k + \gamma_k p_{k+1}, \quad \beta_0 p_0 \equiv 0 \end{aligned}$$

za $k = 1, ..., n-1$. Gornje jednadžbe sa svojstvom biortogonalnosti $P^TQ = I_n$ povlače

$$\alpha_k = p_k^T A q_k$$

i

$$\begin{aligned} \beta_k q_{k+1} &\equiv r_k = (A - \alpha_k I)q_k - \gamma_{k-1}q_{k-1} \\ \gamma_k p_{k+1} &\equiv s_k = (A - \alpha_k I)^T p_k - \beta_{k-1}p_{k-1} \end{aligned}$$

Postoji neka fleksibilnost u biranju skalara β_k i γ_k. Primijetimo da

$$1 = p_{k+1}^T q_{k+1} = (s_k/\gamma_k)^T (r_k/\beta_k)$$

odavde slijedi da β_k određuje γ_k tako da

$$\gamma = \frac{s_k^T r_k}{\beta_k}.$$

Sa "kanonskim" izborom $\beta_k = \|r_k\|_2$ dobivamo

q_1, p_1 dani jedinični vektori t.d. $p_1^T q_1 \neq 0$
$k = 0$
$q_0 = 0, r_0 = q_1$
$p_0 = 0; s_0 = p_1$
while $(r_k \neq 0) \wedge (s_k \neq 0) \wedge (s_k^T r_k \neq 0)$ **do**
  $\beta_k = ||r_k||_2$
  $\gamma_k = s_k^T r_k / \beta_k$
  $q_{k+1} = r_k / \beta_k$
  $p_{k+1} = s_k / \gamma_k$
  $k = k + 1$
  $\alpha_k = p_k^T A q_k$
  $r_k = (A - \alpha_k I) q_k - \gamma_{k-1} q_{k-1}$
  $s_k = (A - \alpha_k I)^T p_k - \beta_{k-1} p_{k-1}$
end while

Ako

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \gamma_{k-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix},$$

tada je situacija na kraju petlje opisana sa jednadžbama

$$A[q_1, ..., q_k] = [q_1, ..., q_k] T_K + r_k e_k \tag{3.6}$$

$$A^T [p_1, ..., p_k] = [p_1, ..., p_k] T_k^T + s_k e_k^T \tag{3.7}$$

Ako $r_k = 0$, onda je iteracija prekinuta i $span\{q_1, ..., q_k\}$ je invarijantan potporstor od A
Ako je $s_k = 0$, onda je iteracija također prekinuta i $span\{p_1, ..., p_k\}$ je invarijantan potprostor od A^T.
Međutim, ako oba uvjeta nisu istinita i vrijedi $s_k^T r_k = 0$, onda proces tridijagonalizacije završava bez ikakvih podataka o invarijantnom prostoru, tu situaciju tada zovemo ozbiljan slom (eng. *Serious Breakdown*).

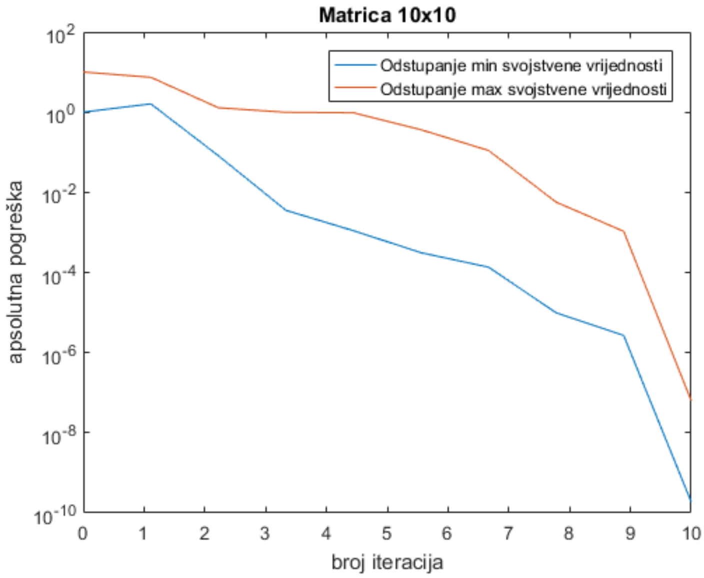
Poglavlje 4

Numerički primjeri

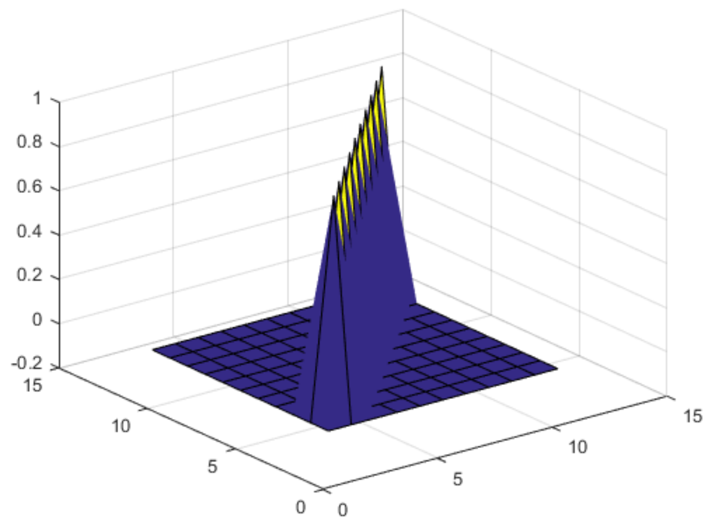
U ovom poglavlju testirati ćemo Lanczosov algoritam i Lanczosov algoritam s potpunom reortogonalizacijom. Testirati ćemo na slučajno generiranim matricama preko Schurove dekompozicije sa dijagonalnom matricom $\Lambda = diag(\lambda_1, ..., \lambda_n) = diag(1 : n)$ za $n = 10, 20, 50, 100$, i provjeriti konvergenciju ekstremnih svojstvenih vrijednosti i gubitak (očuvanost) ortogonalnosti Lanczosovih vektora.

Primjeri osnovnim Lanczosom

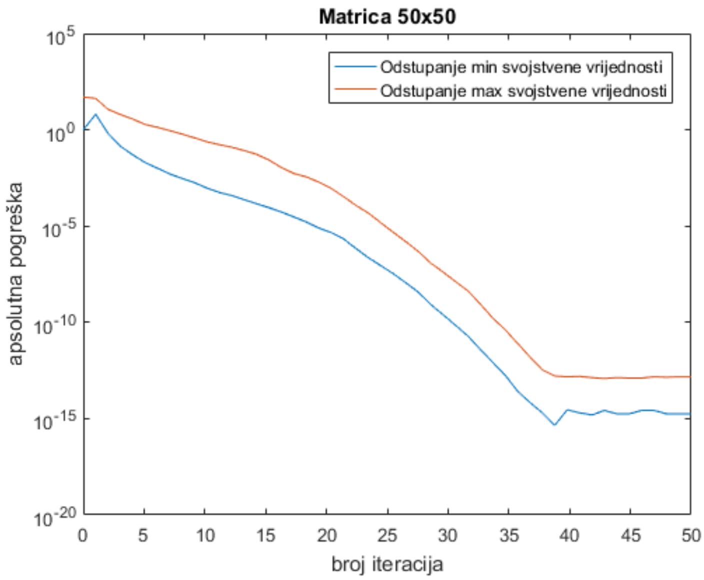
Prvo ćemo testirati matrice redom za $n = 10, 50, 100$ algoritmom 1 i analizirat ćemo rezultate pomoću grafova:



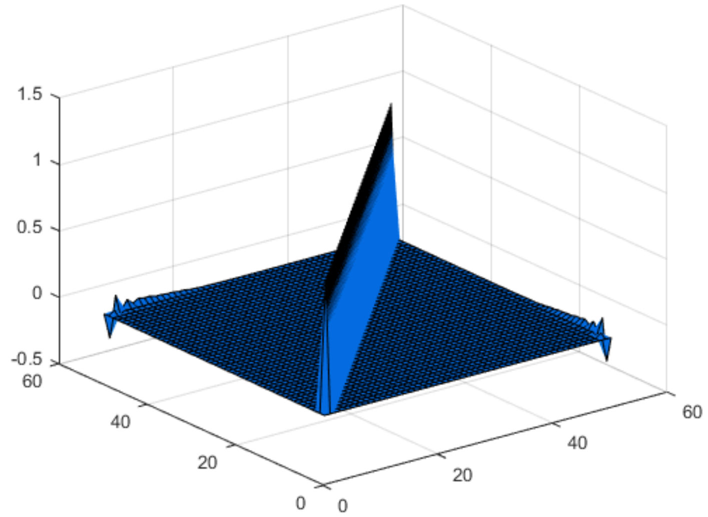
Slika 4.1: konvergencija svojstvenih vrijednost matrice 10×10



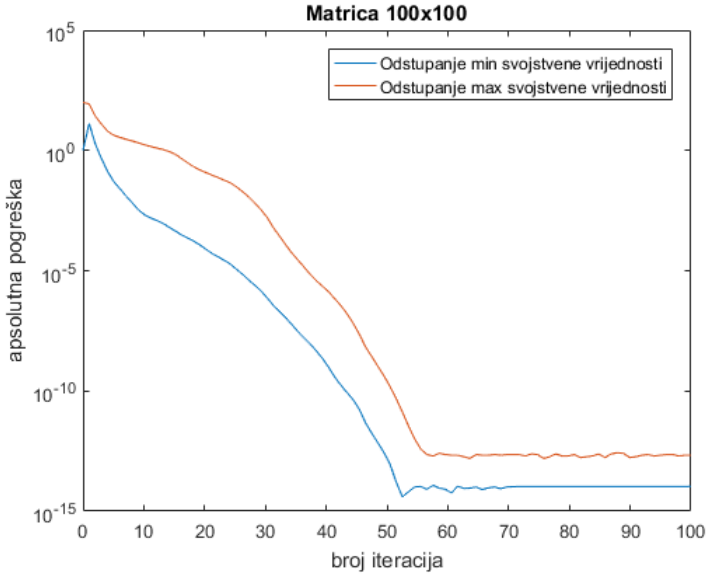
Slika 4.2: Matrice $Q^T Q$, gdje je Q generirana Lanczosovim vektorima za $n = 10$
$\max_{i,j}\{|(Q^T Q - I)(i, j)|\} = 1.1284e - 11$



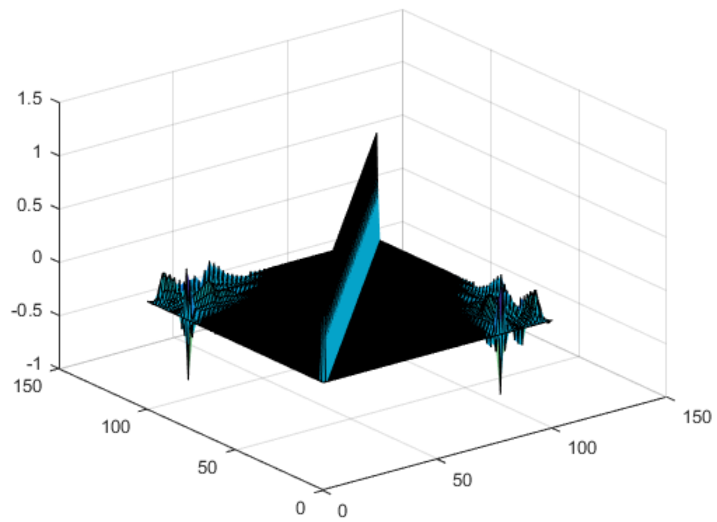
Slika 4.3: Konvergencija svojstvenih vrijednosti matrice 50×50



Slika 4.4: Matrice $Q^T Q$, gdje je Q generirana Lanczosovim vektorima za $n = 50$
$\max_{i,j}\{|(Q^T Q - I)(i, j)|\} = 0.1949$



Slika 4.5: Konvergencija svojstvenih vrijednosti matrice 100×100

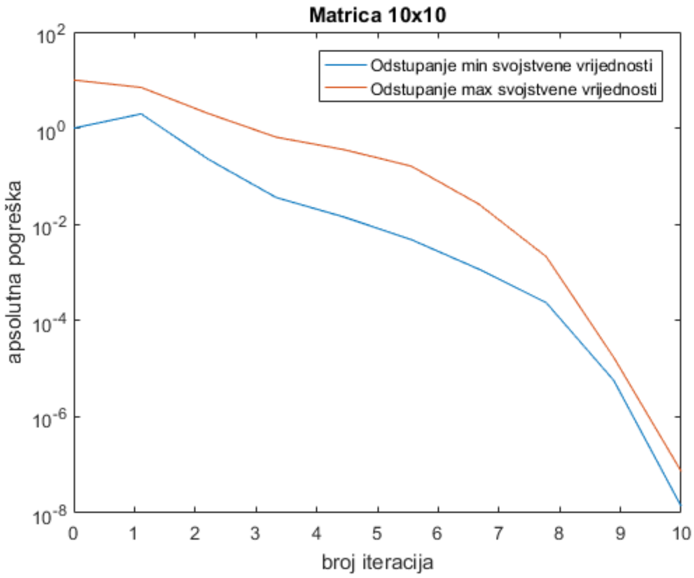


Slika 4.6: Matrice $Q^T Q$, gdje je Q generirana Lanczosovim vektorima za $n = 100$
$\max_{i,j}\{|(Q^T Q - I)(i, j)|\} = 0.6220$

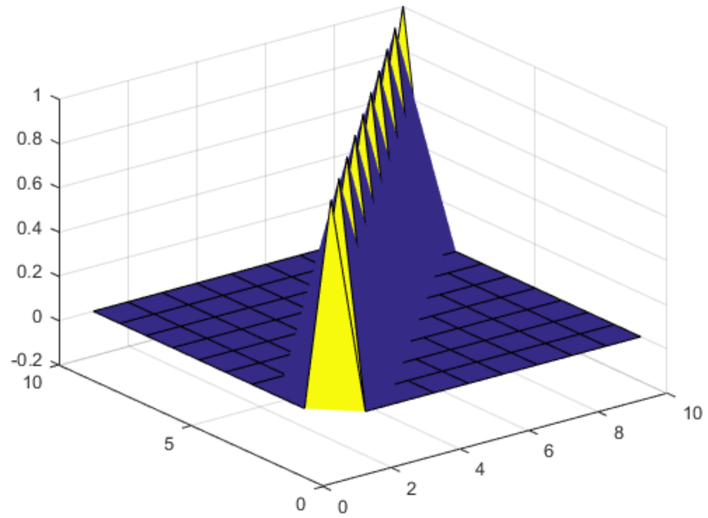
Vidimo da se ponavljaju svojstvene vrijednosti: $1, 2, 3, 99, 100$. o su duhovi svojstvenih vrijednosti koji nastaju kao posljedica gubitka ortogonalnosti stupaca od Q.

Primjeri Lanczosa s potpunom reortogonalizacijom

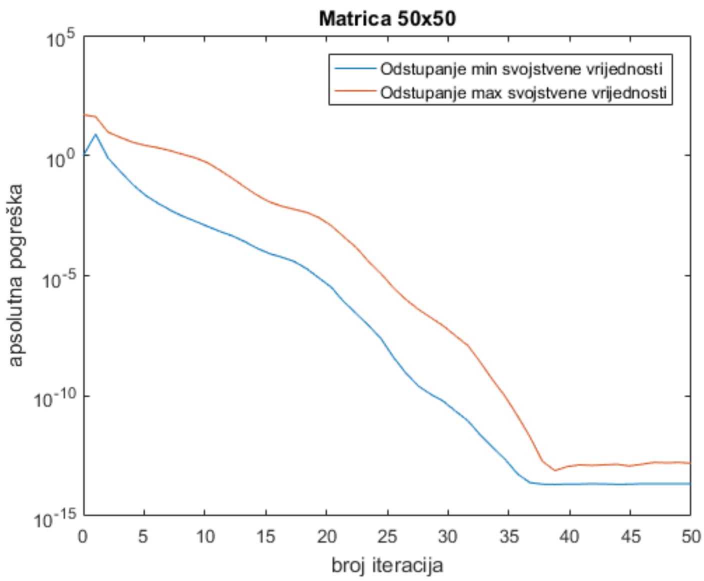
Zatim testiramo matrice redom za $n = 10, 50, 100$ algoritmom 2.2 i analizirat ćemo rezultate pomoću grafova:



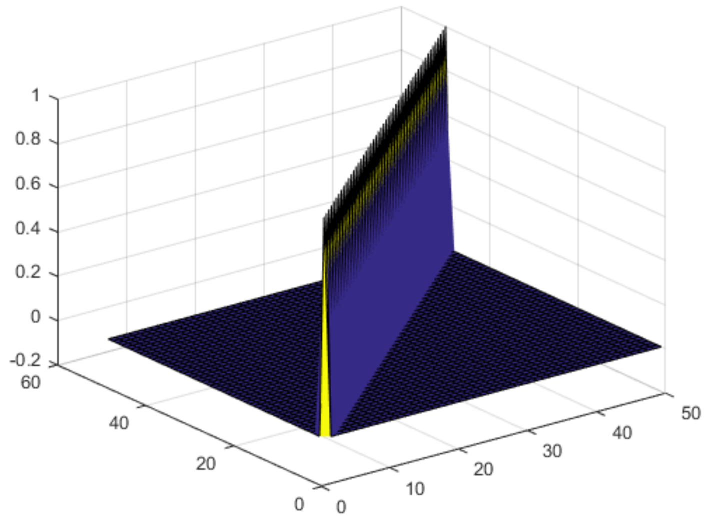
Slika 4.7: Konvergencija svojstvenih vrijednosti matrice 10×10



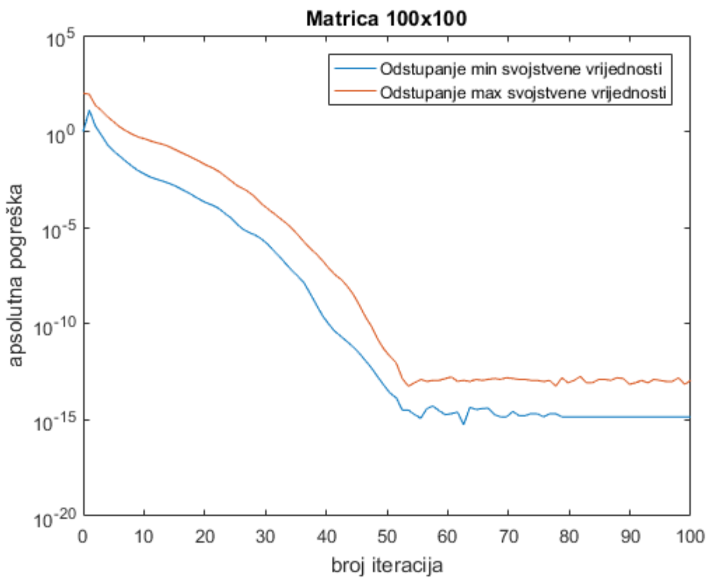
Slika 4.8: Matrice $Q^T Q$, gdje je Q generirana Lanczosovim vektorima za $n = 10$ $\max_{i,j}\{|(Q^T Q - I)(i, j)|\} = 4.4409e - 16$



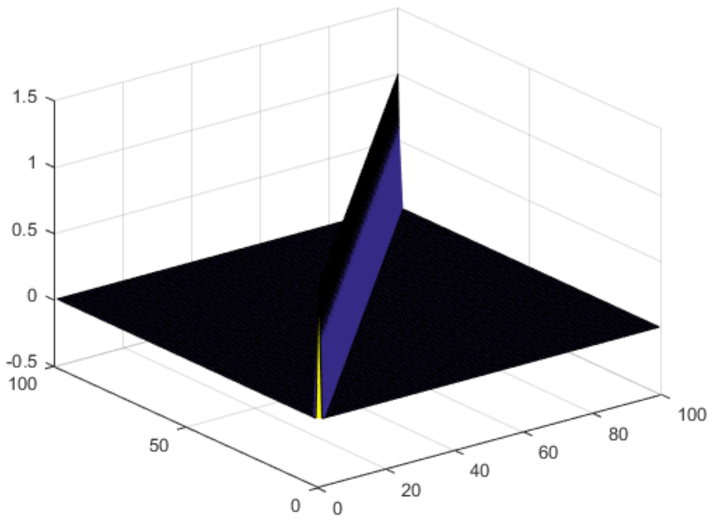
Slika 4.9: Konvergencija svojstvenih vrijednosti matrice 50×50



Slika 4.10: Matrice $Q^T Q$, gdje je Q generirana Lanczosovim vektorima za $n = 50$ $\max_{i,j}\{|(Q^T Q - I)(i, j)|\} = 6.6613e - 16$



Slika 4.11: Konvergencija svojstvenih vrijednosti matrice 100×100



Slika 4.12: Matrice $Q^T Q$, gdje je Q generirana Lanczosovim vektorima za $n = 100$
$\max_{i,j}\{|(Q^T Q - I)(i, j)|\} = 1.2212e - 15$

Zaključak

Primjećujemo da se porastom brojem iteracija gubi ortogonalnost Lanczosovih vektora u osnovnom Lanczsosovom algoritmu. Također, u usporedbi sa Lanczosovim algoritmom sa potpunom reortogonalizacijom za točnost svojstvenih vrijednosti Lanczosovom osnovnom algoritmu je potrebno više koraka da odstupanje aproksimativne svojstvene vrijednosti od egzaktne bude manje. Također primjećujemo da bez reortogonalizacija Lanczosov algoritam generira duhove svojstvenih vrijednosti, kojih nema u matrici A.

Bibliografija

[1] Drmač, Zlatko: *Numerička matematika*. skripta, 2010.

[2] Golub, Gene H. i Charles F. Van Loan: *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, 1996.

[3] Parlett, Beresford N.: *The Symmetric eigenvalue problem*. University of California, 1980.

[4] Saad, Yousef: *Numerical methods for large eigenvalue problems*. Copyright by the Society for Industrial and Applied Mathematics, 2011.

[5] Wang, Tianruo: *Theoretical Error Bounds on the Convergence of the Lanczos and Block-Lanczos Methods*. Disertacija, Department of Computer and Information Science, Sweden, 1999.

Sažetak

U ovom diplomskom radu smo proučavali Lanczosovu i Arnoldijevu metodu koje predstavljaju tehniku za računanje nekoliko najvećih ili najmanjih (ekstremnih) svojstvenih vrijednosti za velike rijetko popunjene (ne)simetrične matrice. U prvom poglavlju smo uveli notaciju i ponovili osnovna svojstva matrice i svojstvenih vektora i njima pridružene svojstvene vrijednosti. U drugom poglavlju detaljno razrađujemo Lanczosovu metodu. Prvo se uvodi pojam Krylovljevog potrpostora, odnosno kako dolazimo do ortonormirane baze, zatim dolazimo do tridijagonalne matrice čije svojstvene vrijednosti aproksimiraju svojstvene vrijednosti naše početne simetrične matrice. Dolazimo do izvoda Lanczosove iteracije, nakon čega opisujemo pogreške i konvergenciju metode. Implementacijom u aritmetici računala uočavamo gubitak ortogonalnosti Lanczosovih vektora zbog čega se daje opis Lanczosa s potpunom ortogonalizacijom koja popravlja gubitak ortogonalnosti. Spominjemo još selektivnu ortogonalizaciju i problem tzv. duhova svojstvenih vektora. Treće poglavlje daje nam uvid u Arnoldijev algoritam koja se temelji na Hessenbergovu dekompoziciju, restartani Arnoldi i nesimetričnu Lanczosovu tridijagonalizaciju. U zadnjem poglavlju, prikazano je nekoliko primjera u kojima primjenjujemo Lanczosov algoritam za simetričnu matricu.

Summary

This thesis presents the Lanzos and Arnold method, which represents a technique for calculating several largest or smallest (extreme) eigenvalues of large sparse symmetric matrices,or a set of eigenvalues of non-symmetric matrix. In the first chapter, we introduced notation and displayed the basic properties of the matrix, eigenvectors and their associated eigenvalues. In the second chapter, we elaborate on Lanczos' method. First, we introduce the notion of Krylov's subspace and how we compute the orthonormal base. That brings us to a tridiagonal matrix whose eigenvalues approximate the eigenvalues of our initial symmetric matrix. The next step includes a derivation of the Lanczos iteration, after which we describe the errors and convergence of the method. When implemented in computer arithmetic we notice a loss of orthogonality of Lanczos vectors, and therefore we describe Lanczos with complete orthogonalization that corrects the loss of orthogonality. We also mention the selective orthogonalization and the problem of the so-called ghost eigenvalue. The third chapter gives us an insight into Arnold's algorithm based on Hessenberg's decomposition, restarted Arnoldi, and asymmetric Lanczos tridiagonalization. In the last chapter, we present a few examples in which we apply the Lanczos algorithm for symmetric matrix.

Životopis

Dolores Jandrić rođena 18.12.1991. u Zagrebu. Završava osnovnu školu Marije Jurić Zagorka 2006. godine u Zagrebu. Srednju školu završava 2010. godine u Zagrebu (XII. gimnaziju- opći smjer.) Školovanje nastavlja na Prirodoslovno - matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Završava preddiplomski studij Matematike 2018. godine, nakon čega na istom fakultetu iste godine upisuje diplomski sveučilišni studij Primijenjene matematike.